

СТАНОВИЩЕ

от проф. дн Петко Маринов Иванов

по материалите, представени в конкурс за заемане на академична длъжност “ДОЦЕНТ”, направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия), обявен в “Държавен вестник”, бр. 63 от 30.07.2021 г..

В конкурса участва единствен кандидат гл. асистент д-р Юлия Русланова Романова.

Основание за изготвяне на становището: Заповед РД-38-455/21.09.2021 на Ректора на Софийски университет “Св. Климент Охридски”.

1. Общи данни за кандидата

Гл. асистент д-р Юлия Русланова Романова е родена на 19.03.1983 год. в гр. Шумен. Завършва природоматематическа гимназия в същия град през 2001 год. Придобива бакалаварска степен по Химия през 2005 год. и образователно-квалификационна степен МАГИСТЪР по специалност Химия, професионална квалификация „Изчислителна химия”, през 2006 год. в Софийски университет “Св. Климент Охридски”. След проведени научни изследвания в СУ и Университета на Haute-Alsace, Франция, през 2010 год. защитава дисертационен труд на тема: “Влияние на средата върху геометрията, електронната структура и магнитните свойства на полианилин” за получаване на образователната и научната степен “Доктор” по научната специалност „Теоретична химия”. Като естествено продължение на проучванията ѝ в дисертационния труд, през следващата година е на 6-месечна постдокторантура в ФХФ-СУ и 3-месечна специализация в Лайбниц института по полимери в гр. Дрезден, Германия. 2012-2014 год. – постдокторантура в Университета на Намюр, Белгия, с проблематика „Симулиране на вибрационни и резонансни раманови спектри на виологени (DFT и CASSCF/CASPT2 пресмятания)”. Научен сътрудник 2014-2016 год. в Института за водещи технологии на Университета на Surrey, Великобритания. С изчислителни методи провежда изследвания върху металополимери и чувствителни спрямо външно стимулиране органометални комплекси. След двегодишно прекъсване по майчинство, от 2018 год. е на длъжност гл. асистент в катедра „Неорганична химия” на ФХФ към СУ.

2. Научни публикации на кандидата

Кандидатът е съавтор на 24 научни публикации индексирани в Scopus, 4 глави от книги (1 от тях индексирани в Scopus, 2 в Web of Knowledge), 2 статии в сборници на конференции и един патент. Участва в конкурса с 14 научни публикации и една глава от книга. 9 от публикациите са в списания с ранг Q1. Три от научните публикации са в *J.Phys.Chem.(C)*, по 1 публикация в *Angew.Chem.Int.Ed.*, *J.Phys.Chem.Letters*, *Chemistry-European Journal*, *PhysChemChemPhys*, *Eur.J.Inorgan. Chem*. В 6 от научните съобщения е първи автор (с основен принос в провеждане на квантовохимичните изчисления и анализ на резултатите), а в 5 публикации – кореспондиращ автор (с основен принос в поставянето на проблема, методологията и анализа на резултатите). Шест от публикациите са от последните 5 години (3 (Q1), 3(Q2)). Има 24 участия с доклади на конференции. Гост редактор на тематична книжка на *Molecules-MDPI* “Metal-Organic

Complexes: Applications in Chemistry and Materials Science". Представена е „Справка с избрани цитати” за 3 Q1-публикации (53 цитата). Общият брой цитирания на всички публикации на кандидата е 249. h-индекс 11. Нямам абсолютно никакви съмнения относно приноса на кандидата в публикациите, представени за конкурса. Документите за участие в конкурса са изготвени прецизно и интелигентно.

3. Участие в научно-изследователски и научно-приложни проекти

Представени са доказателства за участие в 2 текущи проекта финансирани от ФНИ и ФНИ-СУ, като на последния кандидатът е ръководител. 25 е общият брой на научни проекти у нас и в чужбина в разработването на които д-р Романова е взела участие от 2004 год. досега.

4. Учебна заетост и научно ръководство

През предходните три академични години кандидатът има 222, 413 и 295 часа аудиторна заетост, свързана и с ръководство на изготвянето от студенти (1^{ви} курс Химия) на 11 курсови работи (2 от тях изследователски). В рамките на научни проекти, гл. асистент д-р Романова е ръководила работата на един докторант и на 4 студенти-изследователи. Научен консултант на 1 бакалаварска дипломна работа и на 1 докторска дисертация.

5. Научни приноси

Научните приноси на гл.асистент д-р Юлия Романова са в областта на приложната изчислителна химия и са групирани в три направления: (1) органични молекули с отворена електронна обвивка (4 Q1 публикации) – Изследвания проведени в партньорство с 6 изследователски групи от страни в Европа; (2) органометални комплекси (3 Q1 публикации) – Изследвания предимно от проблематика на постдокторантурата в Surrey-UK (работи 6, 7, 9, 15) и успешно продължени във ФХФ-СУ (работи 3 и 5); (3) теоретична спектроскопия (2 Q1 публикации) – Изследвания проведени по време на постдокторантурата в Белгия върху молекули с отворена електронна обвивка. Изследванията в направления 1 и 3 са с тематична насоченост „нови материали”.

5.1. Органични молекули с отворена електронна обвивка

Показано е, че електродвижещата сила (напрежение на отворена верига, Voc) при еднослойни фотоволтаични клетки, съдържащи емералдинова сол като фотоактивен компонент, може съществено да се влияе от полярността на разтворителя [12]. Установен е дирадикалов характер на мономерите и димерните интермедиати при радикаловата полимеризация на поли-*p*-фенилен винилен по метод на Gilch (CASSCF/CASPT2 изчисления) [8]. Обяснени са стабилността и оптичните свойства на бор-дотирани полициклични хромофори (антрацени и фенантрени) и са предложени нови хромофори за синглетно разцепване [4]. Обзорна статия представя преглед на стратегиите за молекулен дизайн на хромофори за синглетно разцепване, с акцент съществени приноси на изследователи жени в областта [2]. Чрез комбиниране на квантовохимични индекси на реактивоспособност и хемометрични подходи е предложен подход за предсказване на лабораторната стабилност на органични молекули, а по този начин и на потенциална възможност за дизайн на стабилни

материали с фотоволтаични свойства. Демонстрирано е, че молекули с различен от нула дирадикалов характер могат да бъдат и лабораторно стабилни [1].

5.2. Органометални комплекси

Проведени са проучвания върху органометални комплекси с участие на Cu(II), Pt(II), Pd(II), Ru(II) и Au(I). Предложени са правила за молекулен дизайн на спин-хибридни молекулни магнити на база орбитално припокриване между метал и лиганд [14]. Изяснени са факторите влияещи върху засилване на металофилното взаимодействие в основно състояние и ролята на лигандното поле за металофилното взаимодействие във възбудено състояние на Pt(II) комплекси. Установено е, че смяната на Pt(II) с Pd(II) в органометални комплекси възпрепятства междумолекулното взаимодействие във възбудено състояние. Концентрационно и фазово зависимите луминесцентни свойства на Pt(II)-комплекси са обяснени с формирането на ексимери с доминиращо металофилно взаимодействие [7, 9, 15]. Предложени са нови луминофори с възможност за излъчване в два различни енергетични диапазона на база хетеролептични комплекси на Ru(II) [6], в частност и нови pH-чувствителни луминесцентни материали [5]. Предложено е обяснение за цитотоксичността на комплекси на Au(I), като е показано, че тя зависи от σ -донорните свойства на изолираните лиганди [3].

5.3. Теоретична спектроскопия

Резонансните Раманови и UV/vis абсорбционни спектри на метилвиологен и парафенилен-удължен виологен са симулирани с мултиконфигурационен метод ((SS)-, (SA)-, (SA2)-CASSCF) и хибридният обменно-корелационен функционал LC-BLYP с различни параметри за далекодействаща корекция на обменните взаимодействия. Показано е, че електрон-вибрационното взаимодействие при дирадикалоиди зависи от дължината на π -електронното спрежение при вмъкване на парафениленова група между пиридиновите ядра. Демонстрирано е, че оценката на силата на електрон-вибрационното взаимодействие при катион-радикали е силно зависима от избора на параметър за корекция на обменните взаимодействия на голямо разстояние при TD-DFT методите, от вида на съединението и от типа на възбуденото състояние [10, 11].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представените материали отговарят напълно по обем и съдържание на изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България, на изискванията на СУ, и на изискванията на ФХФ към СУ. Кандидатът е изграден учен, способен да решава сложни научни и научно-приложни задачи в областта на Теоретичната химия. Имам лични впечатления от д-р Романова от курса по Молекулярна механика към магистратурата по Изчислителна химия. Силно съм впечатлен от научното ѝ израстване през последните 10-15 години – актуална научна проблематика и активни международни научни контакти.

След запознаване с представените от кандидата материали, научни и научно-приложни приноси, и анализ на тяхната значимост, убедено давам своята положителна оценка и препоръчвам на Научното жури да изготви предложение до Факултетния съвет на ФХФ-СУ за избор на гл. асистент д-р Юлия Русланова Романова на академичната длъжност „ДОЦЕНТ“.

проф. Петко Иванов

